

Spis treści

Przedmowa	IX
Oznaczenia	XIII
1. Preliminaria	1
1.1. Termodynamika	1
1.2. Oddziaływania międzycząsteczkowe	5
2. Kompendium podstaw materii miękkiej	15
2.1. Napięcie powierzchniowe	15
2.2. Kształt powierzchni kropli/pęcherzyka – równanie Laplace’a	16
2.3. Kropla na powierzchni ciała stałego	22
2.4. Oddziaływania kapilarne	26
2.5. Właściwości pian	27
2.5.1. Samoorganizacja w pianach monodispersyjnych	28
2.5.2. Stabilna piana – równanie stanu	29
2.5.3. Piany podlegające starzeniu Ostwalda (<i>Ostwald ripenig</i>) – równanie von Neumanna	30
2.6. Układy micelarne	31
2.6.1. Micela w stanie równowagi – parametr <i>cmc</i>	31
2.6.2. Parametr upakowania surfaktantu i <i>HLB</i>	32
2.6.3. Struktura układów woda–olej–surfaktant. Zasada Bancrofta ...	34
2.7. Ciśnienie powierzchniowe	35
2.8. Roztwory polimerów – modele polimerów na sieci	38
2.8.1. Idealna makrocząsteczka	38
2.8.2. Entropia idealnego łańcucha	43
2.8.3. Efekt objętości wyłączonej	45
2.8.4. Wpływ entropii na konformację kłęбка	46
2.8.5. Entropia SAW	48
2.8.6. Włączenie oddziaływań międzycząsteczkowych – teoria Flory’ego–Hugginsa	49
2.9. Reologia materii miękkiej	55
2.9.1. Struktura i właściwości reologiczne układów dyspersyjnych ...	62
2.9.2. Właściwości reologiczne roztworów polimerów	64
2.10. Koloidy	66
2.10.1. Rozpraszanie światła – eksperymenty SLS i DLS	68
2.10.2. Kinetyka koagulacji	71

2.10.3. Adsorpcja	74
2.10.4. Potencjał elektrokinetyczny	78
2.11. Układy ciekłokrystaliczne	81
2.12. Zastosowane techniki symulacji	82
2.12.1. Metoda Monte Carlo	82
2.12.2. Metoda elementów skończonych	83
2.12.3. Dynamika brownowska	83
2.12.4. Inne	84
3. Krótkie wprowadzenie do programowania w języku Python	85
3.1. Typy zmiennych	85
3.2. Funkcje	86
3.3. Przyjmowanie danych z konsoli	88
3.4. Konwertowanie typów zmiennych	88
3.5. Mnożenie zmiennych typu string	89
3.6. Pętle for	90
3.7. Funkcja range ()	91
3.8. Pętla while	93
3.9. Instrukcje warunkowe	94
3.10. Kontenery	97
3.11. Praca z plikami	99
3.12. Korzystanie z dodatkowych bibliotek	101
3.13. Generowanie liczb pseudolosowych	103
4. Krótkie wprowadzenie do programowania w programie Surface Evolver	105
4.1. Sekcja danych	106
4.1.1. Wierzchołki	107
4.1.2. Krawędzie	107
4.1.3. Ściany	108
4.1.4. Bryły	109
4.2. Odczyt danych	109
4.3. Polecenia użytkownika	109
4.3.1. Wizualizacja	109
4.3.2. Optymalizacja i minimalizacja energii	110
4.4. Dodatkowe opcje programu Surface Evolver	113
4.4.1. Optymalizacja sieci trójkątów	113
4.4.2. Dodatkowe opcje sekcji danych	113
4.4.3. Dodatkowe obliczenia	114
4.4.4. Zapisywanie danych do pliku	115
4.4.5. Korzystanie z wielu plików	116
4.5. Bardziej złożone układy	117
4.6. Periodyczne warunki brzegowe	118

Ćwiczenia	121
Ćwiczenie 1. Kropła cieczy na powierzchni ciała stałego. Zależność kąta zwilżania od napięć międzyfazowych	121
Ćwiczenie 2. Równanie stanu piany	138
Ćwiczenie 3. Kinetyka zanikania komórek w płynach komórkowych	149
Ćwiczenie 4. Modelowanie konformacji giętkich łańcuchów polimerowych. Metoda statyczna MC	171
Ćwiczenie 5. Entropia konformacyjna liniowego łańcucha polimerowego	186
Ćwiczenie 6. Wpływ rozpuszczalnika na konformację liniowej makrocząsteczki. Metoda Metropolis-MC	198
Ćwiczenie 7. Dynamiczne rozpraszanie światła. Symulacja metodą dynamiki brownowskiej	219
Ćwiczenie 8. Kinetyka koagulacji	232
Ćwiczenie 9. Micelizacja surfaktantów jonowych	242
Ćwiczenie 10. Reologiczne właściwości roztworów polimerów	254
Ćwiczenie 11. Kropła rozlewająca się na jednorodnej płaskiej powierzchni	276
Ćwiczenie 12. Miareczkowanie potencjometryczne słabego polikwasu	285
Ćwiczenie 13. Czy kropła spoczywająca na powierzchni w polu grawitacyjnym jest perpetuum mobile?	292
Zadania do samodzielnego opracowania	299
 Dodatek (elementy języka Surface Evolver dla edytora Notepad++, userDefineLang.xml)	 301
 Skorowidz	 305